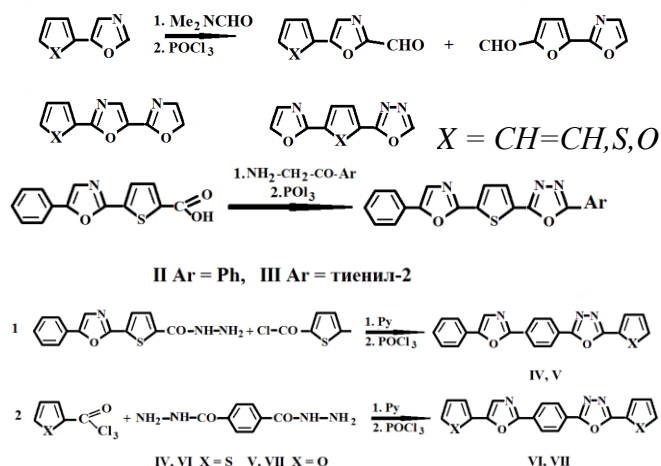
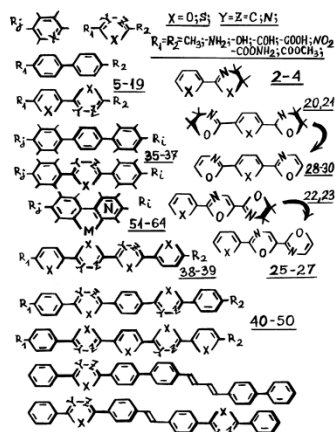


**СПЕКТРОСКОПИЯ ОСНОВНОГО И ОРБИТАЛЬНАЯ ПРИРОДА
ЭЛЕКТРОННЫХ СИНГЛЕТНЫХ И ТРИПЛЕТНЫХ ВОЗБУЖДЁННЫХ
СОСТОЯНИЙ И РЕАКЦИОННАЯ СПОСОБНОСТЬ ФЕНИЛ-, ФУРИЛ-,
ТИЕНИЛОКСАЗОЛОВ И ОКСАДИАЗОЛОВ
И ИОН-РАДИКАЛЬНЫХ ФОРМ**

Ключевые слова: спектроскопия, бензол, фуран, тиофен, оксазол, оксадиазол, электронные процессы, орбитальная природа, возбуждённые состояния, синглет, триплет, комплексообразование, протонирование, реакционная способность.

Осуществлён синтез серий моно-, би-, три-, пента и септимациклических многоатомных *N*-, *O*-, *S*-соединений углеводов на основе бензола, фурана, тиофена, пиридина, оксазола и оксадиазола с электроно-акцепторными и электроно-донорными заместителями, а также на основе квазиавтономных структурных фрагментов, которые широко применяются в качестве биологических систем, дай-лазеров, ОЛЕД- и ОТЕТ-устройств, компонентов (добавок и присадок) для горюче-смазочных материалов: топлива, горючих, смазочных масел и специальных жидкостей. Проведена спектральная интерпретация реакционной способности веществ, на основе изученных спектрально-люминесцентных и лазерно-оптических свойств и характеристик электронных возбуждённых синглетных и триплетных состояний (дублетных D^*n и квартетных Q^*m для ионов и радикалов), рассчитанных квантовохимическими методами – МО-ЛКАО ССП-расширенное-КВ-ЧПДП/С.



Проведена атомно-молекулярная идентификация веществ по пространственной и электронной структуре с помощью внутримолекулярных механизмов сверхтонкого электронно-ядерного взаимодействия в системах $S^*iTjD^*nQmЭВС$ (рис. 1). Изучены физико-химические и спектральные свойства соединений по характеристикам спектров: рефракции, ЯМР, ЭПР, ИК- и УФ-поглощения, Рамана, люминесценции при $-500 - 77 - 2,6^\circ K$ и типах накачки (ИК- и УФ-лазеры, лампы, потоки ионы и электроны) [1–3].

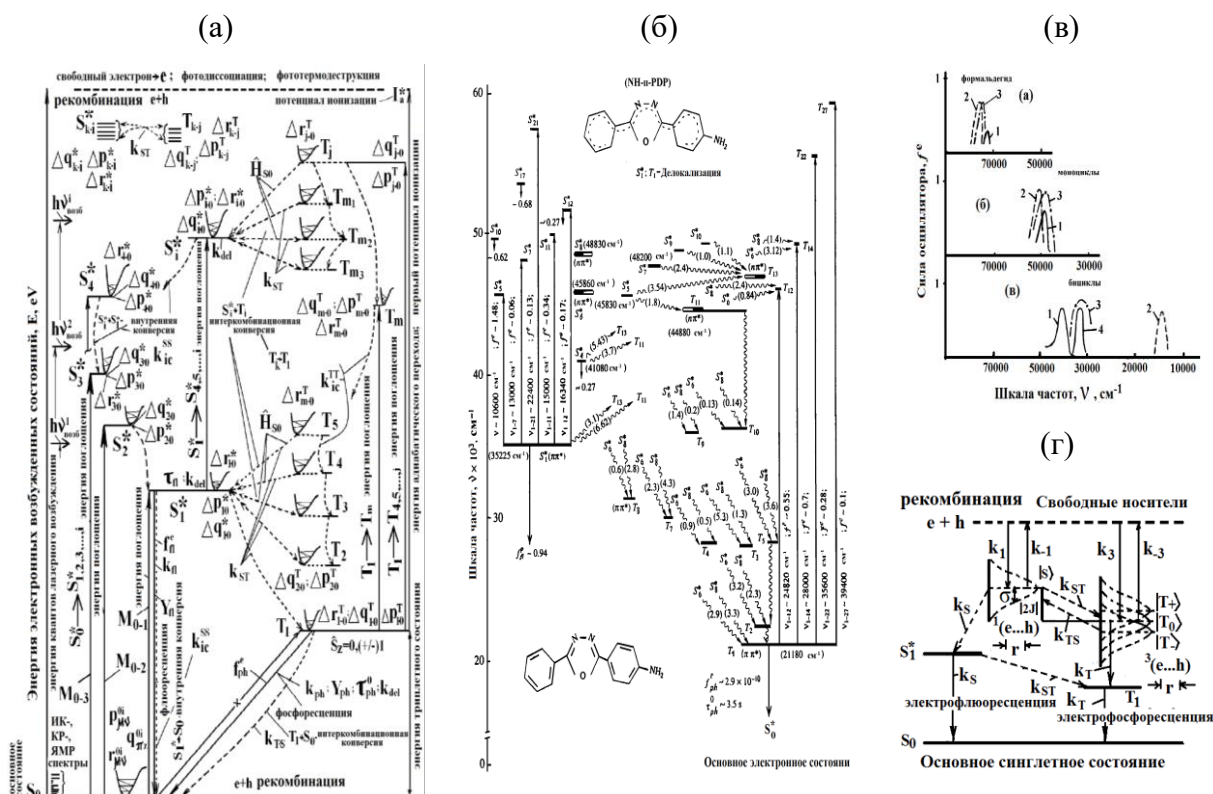


Рисунок. (а) – Многоуровневая система излучательных, спин-орбитальных и электронно-колебательных многоступенчатых безизлучательных переходов в полном спектре синглетных и триплетных (S^*_i и T_j) электронно-возбужденных состояний $S^*iTjD^*nQmЭВС$ (“элементарный акт”)

для многоатомных соединений (дублет D^*_i и квартет Q^*_j для ионов), рассчитанная методами ЛКАО-МО ССП расширенное-КВ ЧПДП/С. Здесь: M_{0i} – матричные моменты электрических дипольных переходов $S_0 \rightarrow S^*_{1,...,i}$, формирующих спектр поглощения; H_{S_0} – матричные моменты спин-орбитального взаимодействия; наборы собственных частот колебаний атомных групп квазиосцилляторов $\{r_n\}$, формирующих активный волновой пакет при переходах между промежуточными термами $S^*_{1,...,i}T_{1,...,j}$. Стрелками обозначены частоты и силы осцилляторов 0-0-переходов ($S_1^* \rightarrow S_0$ и $T_1 \rightarrow S_0$), формирующих тонкоструктурные электронно-колебательные полосы флюоресценции (Фл) и фосфоресценции (Фф), и в спектрах, наведенных накачкой $S^*_1 \rightarrow S^*_{2,...,i}$ и $T_1 \rightarrow T_{2,...,j}$ поглощения за время жизни нижних $S^*_i T_j D_n Q_m ЭВС$. Стрелками обозначены частоты и силы осцилляторов излучательных переходов: Фл – $S_1^* \rightarrow S_0$ и Фф – $T_1 \rightarrow S_0$, наведённое накачкой поглощение – $S_1^* \rightarrow S^*_{2,...,i}$ и $T_1 \rightarrow T_{2,...,j}$ до акта испускания фотона. Вертикальными стрелками вверх показан механизм многоступенчатой фотоионизации с формированием колебательно разогретого электрона – e^- ($\Delta E_{\text{кол}}$). Здесь $\Delta r_{\mu\nu}$, $\Delta p_{\mu\nu}$ и $\Delta q_{\mu\nu}$, $\Delta \rho^{0i}_{\mu\nu}$ – изменение длин, порядков валентных связей, зарядов и полных электронных плотностей на атомах в каждом из $S^*_i T_j ExElSt$. Полные схемы энергетических состояний $S^*_i T_j ЭВС$: (б) – пара-амино-2,5-фенил-1,3,4-оксадиазол (*n-NH₂-PDP*). (в) – Относительное расположение спектральных полос: (1) УФ-поглощения и наведённого накачкой (2) синглет-синглетного поглощения и (3) триплет-триплетного поглощения ион-радикальных форм: (а) – полинасыщенных (б) – монозамещенных циклических и (с) – бициклических углеводов. (г) – Электронные термы, соответствующие фотодиссоциации до ион-радикалов в континуум.

Список литературы

1. Обухов А. Е. // Оптика и спектроскопия. 2018. Т. 124, вып. 5. С. 662–668.
2. Обухов А. Е., Бельский Л. И. // ХГС. 1999. Т. 7. С. 948–974.
3. Obukhov A. E. // Laser Physics. 2003. Vol. 3. P. 847–855.